

УДК 537.32

© 1990

ТЕРМОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА СЛУЧАЙНО-НЕОДНОРОДНЫХ ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ В СЛАБЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

И. И. Фишук

Развита теория термомагнитных свойств случайно-неоднородных трехмерных твердотельных систем в слабых магнитных полях в рамках метода эффективной среды. Полученные общие выражения применены к двухкомпонентным системам — полупроводникам со случайными диэлектрическими включениями. Показано, что постоянная Нернста падает при увеличении доли объема, занятого диэлектрическими включениями. При сильной разупорядоченности эффект Нернста исчезает. Найдено, что благодаря разупорядоченности в системе появляются изменения термоэдс в продольном магнитном полю направлении, которые отсутствуют в кристаллических полупроводниках. Отношение изменения термоэдс в продольном к изменению термоэдс в поперечном магнитном полю направлении возрастает, стремясь к единице, при увеличении разупорядоченности в системе.

1. В последнее время значительное внимание уделяется теоретическому исследованию термоэлектрических и термомагнитных свойств случайно-неоднородных систем [1-11]. В основном изучалось критическое поведение исследуемых величин в окрестности порога протекания в двухкомпонентных системах [4-7]. Для исследования термоэдс в трехмерных неоднородных системах использовались метод эффективной среды (МЭС) и численные расчеты [1]. В [3] проводились численные расчеты термоэдс, подтвердившие результаты работы [1]. В [2] рассмотрены (также с использованием МЭС) термоэлектрические свойства двухкомпонентных систем с двумерным распределением неоднородностей (тонких пленок). Важным результатом цитируемых работ является то, что если одна из компонент системы является диэлектриком, то эффективное значение термоэдс всей системы совпадает с термоэдс проводящей компоненты во всей области концентраций компонент выше порога протекания. Термомагнитные свойства трехмерных систем исследовались в [10] в окрестности порога протекания, а двумерных систем — в [8] (см. также [11]). В работах [8, 10] использовалось линейное по магнитному полю H приближение. Такого приближения достаточно для исследования эффекта Нернста. Однако для исследования изменения термоэдс в магнитном поле необходимо учитывать [12] по крайней мере квадратичное по H приближение.

В настоящей работе в рамках МЭС развита теория термомагнитных свойств случайно-неоднородных трехмерных твердотельных систем в квадратичном по H приближении. Полученные общие выражения применены к двухкомпонентным системам — полупроводникам со случайными диэлектрическими включениями. Показано, что наличие диэлектрических включений приводит к появлению изменений термоэдс в продольном магнитном полю направлении, отсутствующих в однородной среде. С приближением к порогу протекания отношение продольного к поперечному изменениям термоэдс стремится к единице.

2. Будем рассматривать проводящие твердотельные системы, содержащие случайные макроскопические неоднородности (сферические включения с пониженной проводимостью). Внешнее поле H направлено вдоль оси OZ . Предположим, что длина свободного пробега электрона намного

меньше средней протяженности неоднородностей. В этом случае введем для точки \mathbf{r} локальные значения тензоров электропроводности $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$, теплопроводности $\hat{\kappa}(\mathbf{r})$ и термоэдс $\hat{\alpha}(\mathbf{r})$. Так как в реальных образцах термоэлектрические эффекты малы, мы ограничимся вкладом, только линейными по этим эффектам. В этом случае выражения для локальных плотностей электрического тока $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ и потока тепла $\mathbf{Q}(\mathbf{r})$ имеют вид

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \hat{\alpha}(\mathbf{r}) \hat{\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{G}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r}) = \hat{\kappa}(\mathbf{r}) \mathbf{G}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\Phi(\mathbf{r})$, $\mathbf{G}(\mathbf{r}) = -\nabla T(\mathbf{r})$ — напряженности электрического и температурного полей. В выражении (2) мы пренебрегли вкладом, линейным по $\hat{\alpha}(\mathbf{r})$, так как его учет [13] может привести только к квадратичным по $\hat{\alpha}(\mathbf{r})$ поправкам к исследуемым нами кинетическим характеристикам. Эффективные значения $\hat{\sigma}_m$, $\hat{\kappa}_m$, $\hat{\alpha}_m$, \mathbf{J}_m и \mathbf{Q}_m связаны выражениями

$$\mathbf{J}_m = \hat{\sigma}_m \mathbf{E}_0 + \hat{\alpha}_m \hat{\alpha}_m \mathbf{G}_0, \quad \mathbf{Q}_m = \hat{\kappa}_m \mathbf{G}_0, \quad (3), (4)$$

где $\mathbf{J}_m = \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}) \rangle$, $\mathbf{Q}_m = \langle \mathbf{Q}(\mathbf{r}) \rangle$, $\mathbf{E}_0 = \langle \mathbf{E}(\mathbf{r}) \rangle$, $\mathbf{G}_0 = \langle \mathbf{G}(\mathbf{r}) \rangle$. Угловые скобки означают конфигурационное усреднение. Полагая в (1) и (3) $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = 0$, $\mathbf{J}_m = 0$, находим

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\hat{\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{G}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{E}_0 = -\hat{\alpha}_m \mathbf{G}_0. \quad (5), (6)$$

Подставляя $\mathbf{G}(\mathbf{r})$ и \mathbf{G}_0 , найденные из (5), (6), в (2), (4), имеем

$$\mathbf{Q}(\mathbf{r}) = \hat{\gamma}(\mathbf{r}) \mathbf{E}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{Q}_m = \hat{\gamma}_m \mathbf{E}_0, \quad (7), (8)$$

где

$$\hat{\gamma}(\mathbf{r}) = -\hat{\kappa}(\mathbf{r}) \hat{\alpha}^{-1}(\mathbf{r}), \quad \hat{\gamma}_m = -\hat{\kappa}_m \hat{\alpha}_m^{-1}. \quad (9), (10)$$

К выражениям, представленным в форме (7), (8), как и к выражениям (2), (4), можно развить МЭС для вычисления величин $\hat{\gamma}_m$, $\hat{\chi}_m$. Определив $\hat{\gamma}_m$ и $\hat{\chi}_m$, можно из (10) вычислить

$$\hat{\alpha}_m = -\hat{\gamma}_m^{-1} \hat{\chi}_m. \quad (11)$$

В работе [14] развита общая теория МЭС для вычисления $\hat{\sigma}_m$ в произвольных \mathbf{H} . Аналогичным образом можно развить теорию МЭС для вычисления $\hat{\gamma}_m$ и $\hat{\chi}_m$. В результате получаем уравнение для $\hat{\gamma}_m$ в виде

$$\langle (I - \Delta \hat{\gamma} \hat{\Gamma})^{-1} \Delta \hat{\gamma} \rangle = 0, \quad (12)$$

где

$$\Delta \hat{\gamma} = \hat{\gamma} - \hat{\gamma}_m, \quad (13)$$

а величины $\Gamma_{xx} = \Gamma_{yy}$ и Γ_{zz} в электростатическом поле в квадратичном по \mathbf{H} приближении принимают форму [15]

$$\Gamma_{xx} = -\frac{1}{3} \frac{1}{\gamma_m^{zz}} - \frac{4}{15} \frac{\gamma_m^{zz} - \gamma_m^{xx}}{(\gamma_m^{zz})^2}, \quad (14)$$

$$\Gamma_{zz} = -\frac{1}{3} \frac{1}{\gamma_m^{zz}} - \frac{2}{15} \frac{\gamma_m^{zz} - \gamma_m^{xx}}{(\gamma_m^{zz})^2}. \quad (15)$$

Компоненты локального значения тензора $\hat{\gamma}$ имеют такой же, как и в упорядоченной системе, вид

$$\gamma_{xx} = \gamma - \Delta \gamma_{xx}, \quad \gamma_{yy} = \gamma_{xx}, \quad \gamma_{zz} = \gamma, \quad (16)$$

$$\gamma_{yx} = \gamma a_{21} (\mu H/c), \quad \Delta \gamma = \gamma a_{11} (\mu H/c)^2, \quad \mu = (e/m) \langle \tau \rangle, \quad (17)$$

τ — время релаксации носителей заряда (здесь угловые скобки означают энергетическое усреднение). Компоненты эффективного значения тензора $\hat{\gamma}_m$ представим в виде

$$\gamma_m^{xx} = \gamma_m^0 - \Delta \gamma_m^{xx}, \quad \gamma_m^{yy} = \gamma_m^{xx}, \quad \gamma_m^{zz} = \gamma_m^0 - \Delta \gamma_m^{zz}, \quad (18)$$

$$\gamma_m^{yx} = \gamma_{21} a_{21} (\mu H/c), \quad \Delta \gamma_m^{xx} = \gamma_{11} a_{11} (\mu H/c)^2, \quad \Delta \gamma_m^{zz} = \gamma_{33} a_{11} (\mu H/c)^2. \quad (19)$$

В этом представлении величины a_{11} и a_{21} зависят от механизма рассеяния носителей заряда. В том случае, когда время релаксации τ не зависит от энергии, имеем $a_{11} = a_{21} = 1$. Зависящие от степени беспорядка величины γ_{11} , γ_{33} , γ_{21} и γ_m^0 подлежат вычислению. Подставляя (14)–(19) в (12) и приравнявая в разложении по H нулевой, линейный и квадратичный члены нулю, получаем для определения этих величин систему уравнений

$$(\gamma_{11} - \gamma_m^0) \langle A \rangle + \langle (2\gamma_{11} + \gamma) (\gamma - \gamma_m^0) A^2 \rangle + \frac{1}{5} \frac{\gamma_{11} - \gamma_{33}}{\gamma_m^0} \langle (\gamma - \gamma_m^0)^2 A^2 \rangle + 3K_1 \gamma_m^0 \langle (\gamma - \gamma_{21})^2 A^3 \rangle = 0, \quad (20)$$

$$\gamma_{33} = \gamma_{11} \frac{2 \langle (\gamma - \gamma_m^0)^2 A^2 \rangle}{15 \langle \gamma_m^0 \rangle^2 \langle A^2 \rangle - 3 \langle (\gamma - \gamma_m^0)^2 A^2 \rangle}, \quad (21)$$

$$\langle (\gamma - \gamma_{21}) A^2 \rangle = 0. \quad (22)$$

Здесь

$$A = 1/(\gamma + 2\gamma_m^0), \quad K_1 = a_{21}^2/a_{11}. \quad (23)$$

Величина $\hat{\gamma}_m$ определяется из уравнения

$$\langle (\gamma - \gamma_m^0) A \rangle = 0. \quad (24)$$

Для дальнейших вычислений необходимо конкретизировать вид функции $P(\gamma)$ распределения значений величины γ . Как и в работе [16], мы рассмотрим двухкомпонентную систему — полупроводник со случайными диэлектрическими включениями, т. е. выберем $P(\gamma)$ в виде [1]

$$P(\gamma) = p\delta(\gamma - \gamma_0) + (1 - p)\delta(\gamma), \quad (25)$$

где p — доля объема, занятого проводящими областями. Подставляя (25) в (20)–(24) и выполняя вычисления, получаем

$$\gamma_{11}/\gamma_m^0 = \varphi_1 + (a_{21}^2/a_{11}) \varphi_2, \quad \gamma_{33}/\gamma_m^0 = \varphi_3 + (a_{21}^2/a_{11}) \varphi_4, \quad (26)$$

$$\gamma_{21}/\gamma_m^0 = 2(3p - 1)/(3p + 1), \quad \gamma_m^0 = \gamma_0(3p - 1)/2, \quad (27)$$

где

$$\varphi_1 = 4(6p - 1)(21p - 1), \quad \varphi_2 = -72p(6p - 1)(1 - p)/(3p + 1)^2(21p - 1), \quad (28)$$

$$\varphi_3 = 6(1 - p)/(21p - 1), \quad \varphi_4 = -108p(1 - p)^2/(3p + 1)^2(21p - 1). \quad (29)$$

Здесь мы ограничились случаем, когда $p > p_c$, где $p_c = 1/3$. В рассматриваемом случае МЭС дает превосходные результаты [17].

Аналогичные расчеты можно выполнить и для величины χ_m исходя из выражений (2), (4). Для этого представим

$$\chi_{xx} = \chi - \Delta \chi_{xx}, \quad \chi_{yy} = \chi_{xx}, \quad \chi_{zz} = \chi, \quad (30)$$

$$\chi_{yx} = \chi d_{21}(\mu H/c), \quad \Delta \chi_{xx} = \chi d_{11}(\mu H/c)^2, \quad (31)$$

$$\chi_m^{xx} = \chi_m^0 - \Delta \chi_m^{xx}, \quad \chi_m^{yy} = \chi_m^{xx}, \quad \chi_m^{zz} = \chi_m^0 - \Delta \chi_m^{zz}, \quad (32)$$

$$\chi_m^{yx} = \chi_{21} d_{21}(\mu H/c), \quad \Delta \chi_m^{xx} = \chi_{11} d_{11}(\mu H/c)^2, \quad \Delta \chi_m^{zz} = \chi_{33} d_{11}(\mu H/c)^2. \quad (33)$$

Здесь величины d_{11} и d_{21} , как и a_{11} и a_{21} , зависят от механизма релаксации. При этом значения $d_{11} = d_{21} = 1$, если τ не зависит от энергии. После расчетов получаем

$$\chi_{11}/\chi_m^0 = \varphi_1 + (d_{21}^2/d_{11}) \varphi_2, \quad \chi_{33}/\chi_m^0 = \varphi_3 + (d_{21}^2/d_{11}) \varphi_4, \quad (34)$$

$$\chi_{21}/\chi_m^0 = 2(3p - 1)/(3p + 1), \quad \chi_m^0 = \chi_0/(3p - 1)2. \quad (35)$$

Для компонент тензора $\hat{\alpha}_m$ из (11) находим

$$\alpha_m^{xx} = -(\gamma_{xx}^x \chi_m^{xx} + \gamma_m^{yx} \chi_m^{yx}) / [(\gamma_{xx}^x)^2 + (\gamma_m^{yx})^2], \quad (36)$$

$$\alpha_m^{zz} = -\chi_m^{zz} / \gamma_m^{zz}, \quad (37)$$

$$\alpha_m^{yx} = -(\gamma_m^{xx} \chi_m^{yx} - \gamma_m^{yx} \chi_m^{xx}) / (\gamma_m^{xx})^2 + (\gamma_m^{yx})^2. \quad (38)$$

Подставляя (26), (27) и (34), (35) в (36)–(38), в квадратичном по \mathbf{H} приближении имеем

$$\Delta \alpha_m^{xx} = (\mu H/c)^2 \alpha_0 \left[\varphi_1 (d_{11} - a_{11}) + \varphi_2 (d_{21}^2 - a_{21}^2) - (a_{21} d_{21} - a_{21}^2) \frac{4(3p-1)^2}{(3p+1)^2} \right], \quad (39)$$

$$\Delta \alpha_m^{zz} = (\mu H/c)^2 \alpha_0 [\varphi_3 (d_{11} - a_{11}) + \varphi_4 (d_{21}^2 - a_{21}^2)], \quad (40)$$

$$\alpha_m^{yx} = (\mu H/c) \alpha_0 (d_{21} - a_{21}) [2(3p-1)/(3p+1)]. \quad (41)$$

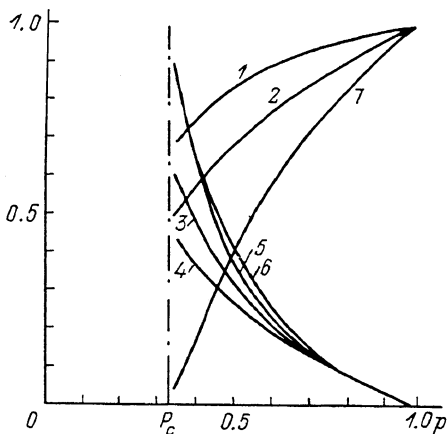
Здесь мы учли, что в отсутствие \mathbf{H} будет $\alpha_m^0 = -x_m^0/\gamma_m^0 = -x_0/\gamma_0 = \alpha_0$, т. е. α_m^0 не зависит от p , что согласуется с результатами работ [1, 4, 7]. Из (39)–(41) видно, что в отсутствие зависимости τ от энергии ($a_{11} = d_{11} = a_{21} = d_{21} = 1$) все компоненты тензора $\Delta \hat{\alpha}_m$ равны нулю при всех рассматриваемых значениях p .

Компоненты локального значения тензора $\hat{\alpha}$ имеют такой же, как и в упорядоченной системе [12], вид

$$\alpha_{xx} = \alpha_0 - \Delta \alpha_{xx}, \quad \alpha_{yy} = \alpha_{xx}, \quad \alpha_{zz} = \alpha_0, \quad (42)$$

$$\alpha_{yx} = \alpha_0 a_{21} (\mu H/c),$$

$$\Delta \alpha_{xx} = \alpha_0 a_{11} (\mu H/c)^2, \quad (43)$$



Зависимость величин $\Delta \alpha_m^{xx}/\Delta \alpha_{xx}$ (1, 2), $\Delta \alpha_m^{zz}/\Delta \alpha_{xx}$ (3, 4), $\Delta \alpha_m^{zz}/\Delta \alpha_m^{xx}$ (5, 6) и $\alpha_m^{yx}/\alpha_{yx}$ (7) от p для $K = 0.1$ (1, 3, 5) и 0.3 (2, 4, 6).

причем в отсутствие зависимости τ от энергии имеем $\alpha_{11} = \alpha_{21} = 0$. Подставляя (16), (17), (30), (31), (42), (43) в (9), легко находим

$$a_{11} = d_{11} - a_{11} - d_{21} a_{21} + a_{21}^2, \quad a_{21} = d_{21} - a_{21}. \quad (44)$$

Подставляя (44) в (39)–(41), окончательно получаем

$$\Delta \alpha_m^{xx} = (\mu H/c)^2 \alpha_0 \left[\varphi_1 (a_{11} + a_{21} d_{21} - a_{21}^2) + \varphi_2 (2a_{21} d_{21} - a_{21}^2) - (a_{21} d_{21} - a_{21}^2) \frac{4(3p-1)^2}{(3p+1)^2} \right], \quad (45)$$

$$\Delta \alpha_m^{zz} = (\mu H/c)^2 \alpha_0 [\varphi_3 (a_{11} + a_{21} d_{21} - a_{21}^2) + \varphi_4 (2a_{21} d_{21} - a_{21}^2)], \quad (46)$$

$$\alpha_m^{yx} = (\mu H/c) \alpha_0 a_{21} [2(3p-1)/(3p+1)]. \quad (47)$$

При $p \rightarrow 1$ (упорядоченная система) имеем

$$\Delta \alpha_m^{xx} \rightarrow (\mu H/c)^2 \alpha_0 a_{11}, \quad \Delta \alpha_m^{zz} \rightarrow 0, \quad \alpha_m^{yx} \rightarrow (\mu H/c) \alpha_0 a_{21}. \quad (48)$$

что согласуется с результатами для кристаллических полупроводников [12]. При $p \rightarrow p_c$ (сильная неоднородность) находим

$$\Delta \alpha_m^{xx} \rightarrow \Delta \alpha_m^{xx} \rightarrow (\mu H/c)^2 \alpha_0 (2/3) (a_{11} - a_{21} d_{21}), \quad \alpha_m^{yx} \rightarrow 0. \quad (49)$$

Рассмотрим случай слабой зависимости τ от энергии (слабой дисперсии), $d_{21} \approx 1$, $a_{11} \ll 1$, $a_{21} \ll 1$, $a_{21} < a_{11}$. Тогда из (45)–(47) получаем

$$\frac{\Delta \alpha_m^{xx}}{\Delta \alpha_{xx}} = \frac{4(6p-1)}{21p-1} \left[1 + K \frac{9p(9p^2-10p+1)}{(6p-1)(3p+1)^2} \right], \quad (50)$$

$$\frac{\Delta \alpha_m^{zz}}{\Delta \alpha_{xx}} = \frac{6(1-p)}{21p-1} \left[1 + K \frac{45p^2-30p+1}{(3p+1)^2} \right], \quad (51)$$

$$\alpha_m^{yx}/\alpha_{yx} = 2(3p-1)/(3p+1), \quad (52)$$

где $K = \alpha_{21}/\alpha_{11}$. На рисунке представлены зависимости $\Delta\alpha_m^{xx}/\Delta\alpha_{xx}$, $\Delta\alpha_m^{zz}/\Delta\alpha_{zz}$, $\Delta\alpha_m^{yz}/\Delta\alpha_{yz}$ и $\alpha_m^{yz}/\alpha_{yz}$ от p при различных значениях K , построенные по формулам (50)—(52).

3. Таким образом, мы обобщили МЭС для вычисления компонент эффективного тензора термоэдс $\hat{\alpha}_m$ в магнитном поле. Найдена компонента α_m^{yz} , определяющая постоянную Нернста $Q_0 = -\alpha_m^{yz}/H$. Из выражений (41), (52) следует, что Q_0 падает при увеличении доли объема, занятого диэлектрическими включениями (уменьшении p). При $p \rightarrow p_c$ (сильная разупорядоченность) величина $Q_0 \rightarrow 0$, т. е. эффект Нернста исчезает.

Существенный результат состоит в том, что благодаря разупорядоченности в системе появляется изменение термоэдс $\Delta\alpha_m^{zz}$ в продольном магнитном полю направлении. Такое изменение отсутствует в кристаллических полупроводниках [12]. При увеличении степени разупорядоченности (уменьшении p) величина $\Delta\alpha_m^{xx}$ уменьшается, а величина $\Delta\alpha_m^{zz}$ возрастает. Отношение $\Delta\alpha_m^{zz}/\Delta\alpha_m^{xx}$ при этом возрастает, стремясь при $p \rightarrow p_c$ к единице. Отметим, что аналогичную особенность имеет и отношение продольного к поперечному магнетосопротивлению в неоднородных системах [15, 16, 18].

Список литературы

- [1] Webman I., Jortner J. Cohen M. // Phys. Rev. B. 1977. V. 16. N 6. P. 2959—2964.
- [2] Балагуров Б. Я. // ФТП. 1982. Т. 16. № 2. С. 259—265.
- [3] Скал А. С. // ЖТФ. 1982. Т. 52. № 2. С. 405—406.
- [4] Балагуров Б. Я. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. № 2. С. 568—584.
- [5] Halpern V. // J. Phys. C. 1983. V. 16. N 1. PL217—L220.
- [6] Скал А. С. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. № 2. С. 516—520.
- [7] Балагуров Б. Я. // ФТП. 1986. Т. 20. № 7. С. 1276—1280.
- [8] Балагуров Б. Я. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 7. С. 2068—2073.
- [9] Балагуров Б. Я. // ФТП. 1987. Т. 21. № 11. С. 1978—1982.
- [10] Снарский А. А. // УФЖ. 1988. Т. 30. № 5. С. 740—743.
- [11] Балагуров Б. Я. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3501—3502.
- [12] Ансельм А. И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1974. 615 с.
- [13] Xia T. K., Zeng X. C. // J. Phys. C. 1987. V. 20. N 32. P. L907—L910.
- [14] Stroud D. // Phys. Rev. B. 1975. V. 12. N 8. P. 3368—3373.
- [15] Фищук И. И. // ФТТ. 1989. Т. 31. № 5. С. 135—139.
- [16] Фищук И. И. // ФТТ. 1987. Т. 29. № 9. С. 2705—2709.
- [17] Kirkpatrick S. // Rev. Mod. Phys. 1973. V. 45. N 4. P. 574—588.
- [18] Шик А. Я. // ФТП. 1975. Т. 9. № 5. С. 872—875.

Институт ядерных исследований
АН УССР
Киев

Поступило в Редакцию
9 апреля 1990 г.
В окончательной редакции
19 июня 1990 г.